



Evento	Salão UFRGS 2013: SIC - XXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2013
Local	Porto Alegre - RS
Título	Aplicação de Métodos de Simulação Molecular no Estudo da Combustão de Biodiesel
Autor	LUCAS VARGAS TASSONI
Orientador	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

Nos últimos anos, a busca por fontes de energia de origem renovável tem recebido grande atenção devido a razões ambientais e político-econômicas. Para uso em motores de combustão interna, o biodiesel tem se mostrado uma alternativa viável, usado puro ou misturado com o óleo diesel de origem fóssil. Entretanto, é importante conhecer as diferenças e semelhanças entre as características da combustão do biodiesel, ésteres graxos obtidos pela esterificação de óleos vegetais de diversas origens, em relação à combustão do diesel convencional. Desta forma, o objetivo deste projeto é investigar, do ponto de vista fundamental, os mecanismos de combustão de ésteres graxos típicos de amostras de biodiesel através de simulações de dinâmica molecular. Este método nos permite obter informações detalhadas do processo, em nível microscópico, identificando as principais reações elementares, as etapas determinantes e espécies intermediárias do mecanismo. A metodologia computacional será validada usando resultados experimentais disponíveis na literatura. Devido à heterogeneidade na composição do biodiesel, será conduzido um estudo comparativo entre ésteres com diferentes estruturas moleculares, considerando o tamanho da cadeia e a presença de ramificações e insaturações. Os resultados iniciais mostram-se promissores, sugerindo que esta ferramenta apresenta grande potencial para aplicação no estudo de reações de combustão de biodiesel, contribuindo de forma sinérgica com estudos experimentais, levando a uma redução no custo e tempo envolvidos, além de auxiliar na interpretação de resultados.